

МОДЕЛИРОВАНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ АДСОРБЦИИ/ДЕСОРБЦИИ АЗОТА НА ОКСИДЕ ГАДОЛИНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И УТОЧНЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТИ

Машковцев М.А.*, Смышляев Д.В., Касимова Р.Е.,
Боталов М.С., Берескина П.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: maxftf@yandex.ru

MODELING OF LOW-TEMPERATURE ADSORPTION/DESORPTION OF NITROGEN ON THE GADOLINIUM OXIDE FOR IDENTIFICATION AND SPECIFICATION OF SURFACE PROPERTIES

Mashkovcev M.A.*, Smyshlyaev D.V., Kasimova R.E.,
Botalov M.S., Bereskina P.A.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The study focuses on the characterization of the gadolinium oxide surface by the method of low-temperature adsorption/desorption of nitrogen. The specific surface of gadolinium oxide, the average pores diameter and fractal dimension was determined. The refinement of the pore distribution was performed on the basis of the NLDFT model. It was shown that there are three populations of pores with an average size of 150, 300 and 600 Å.

Оксиды РЗЭ широко используются в различных областях техники. Важнейшей характеристикой оксидов РЗЭ, определяющей возможность их применения в качестве люминофоров, полировальных порошков, катализаторов, является структура агрегирования кристаллитов в макрочастицы. В работе проведено определение удельной поверхности, пористости и фрактального размера поверхности оксида гадолиния методом низкотемпературной адсорбции-десорбции азота на приборе Nova1200e компании Qantochrome с программным обеспечением NovaWin 10.01. Уточнение свойств поверхности оксида гадолиния проводили путем моделирования процесса низкотемпературной адсорбции азота при использовании модели с нелокализованной функцией плотности (NLDFT) для диоксида кремния с цилиндрическими порами.

Изотерму низкотемпературной адсорбции и десорбции азота на оксиде гадолиния снимали в интервале давлений относительно атмосферного от 0,1 до 0,99 с шагом 0,05. В области высоких давлений добавлены точки 0,98 и 0,99. Равновесие считалось достигнутым, если давление в системе не изменялось более чем на 0,5 мм. ртутного столба в течении 60 секунд. Из формы петли гистерезиса сделан вывод, что поры в образце оксида гадолиния имеют цилиндрическую форму, поэтому для моделирования выбрана модель оксида кремния с цилиндрическими порами. Среднее разнотечение реальной изотермы адсорбции и

построенной модели не превышало 2%. Удельная поверхность оксида гадолиния по методу БЭТ составляет $27.7 \text{ м}^2/\text{г}$, суммарный объем пор – $0,345 \text{ мл/г}$, средний диаметр пор методом ВЈН (по ветви десорбции) – 332 Å . Фрактальный размер, измеренный методом Неймарка-Киселева, составляет $2,33 \text{ Å}$. Распределение пор по размеру, построенное методом капиллярной конденсации представлено на рисунке 1 (а), распределение, полученное по модели, представлено на рисунке 1 (б). На основании построенной модели можно сделать вывод о наличии в образце как минимум трех популяций пор различного размера со средними диаметрами 150 , 300 и 600 Å .

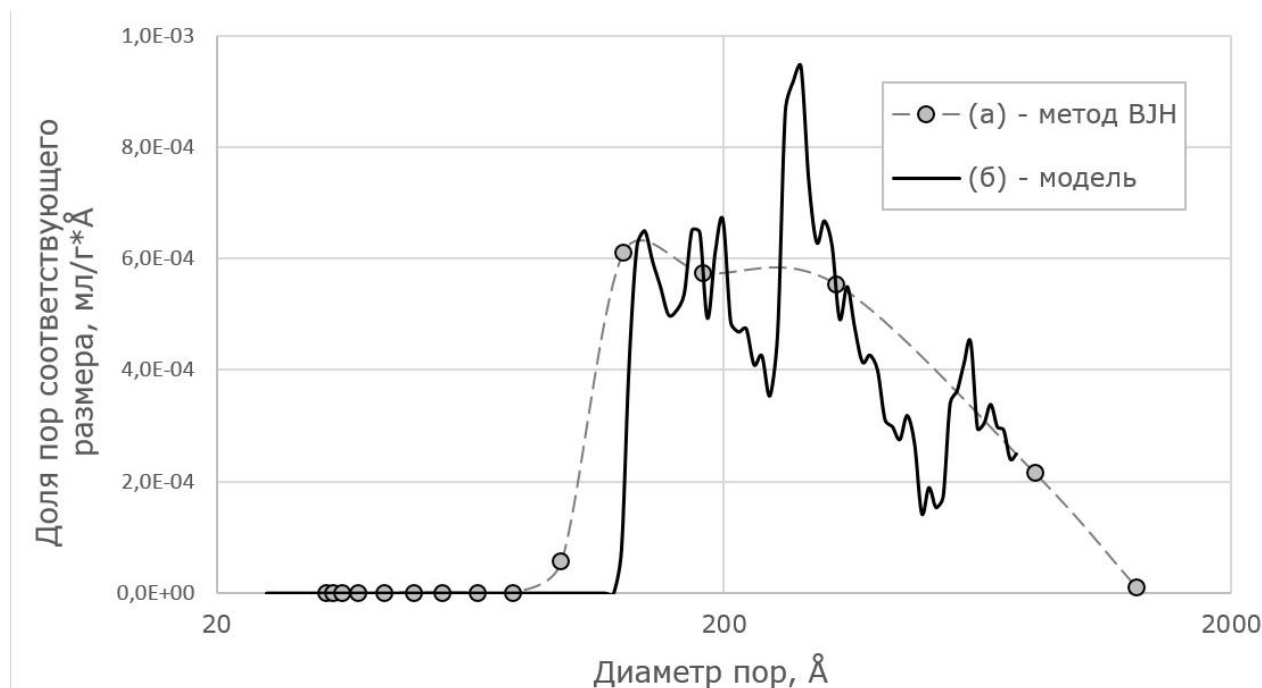


Рис. 1. Распределение пор в оксиде гадолиния. а – данные полученные из реальной изотермы по методу ВЈН (ветвь десорбции), б – данные полученные по равновесной модели с нелокализованной функцией плотности (NLDFT) для диоксида кремния с цилиндрическими порами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, соглашение о предоставлении субсидии от 29.09.2014 г. No 14.581.21.0002 (уникальный идентификатор соглашения RFMEFI58114X0002), в рамках ФЦП “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы”.